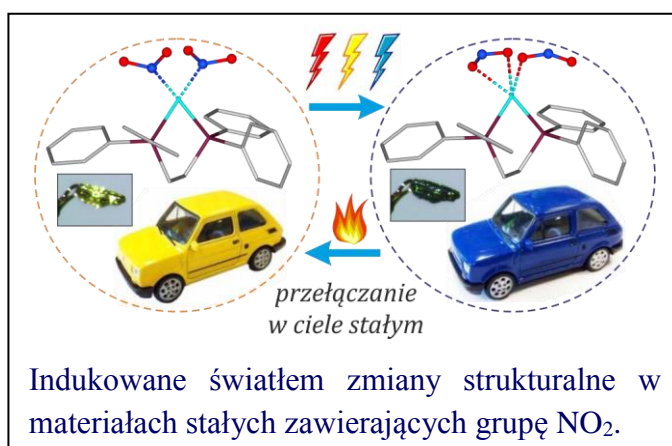




## NO<sub>2</sub>-SWITCH: Badania fotokrystalograficzne przelączalnych nitrowych kompleksów metali przejściowych okresu 4.

Jedną z najważniejszych dziedzin nauki jest obecnie chemia materiałów w określony sposób reagujących na bodziec zewnętrzny i wysyłających sygnał, który daje nam informację o tym, co się dzieje i który możemy dalej wykorzystać. Kompleksy metali przejściowych, dzięki specyficznym oddziaływaniom oraz ciekawym właściwościom optoelektronicznym i magnetycznym, niejednokrotnie spełniają te kryteria. Ich unikatowe właściwości przekładają się na zastosowania takich układów w chemii materiałowej, jak również warunkują procesy biologiczne.

Celem tego projektu jest dokładne zbadanie dynamiki i natury przełączania molekuł, zachodzącego pod wpływem światła. Skoncentrujemy się tutaj na badaniu zmian strukturalnych (zrywanie się wiązań chemicznych, tworzenie się nowych wiązań), które zamierzamy monitorować za pomocą zaawansowanych metod fotokrystalograficznych wspomaganych obliczeniami teoretycznymi. Takie podejście pozwoli nam na zbadanie zależności pomiędzy zachowaniem się materiału (przełączanie, stopień konwersji), zmianami jego wyglądu (np. koloru) pod wpływem czynników zewnętrznych a jego strukturą na poziomie mikroskopowym.



Projekt jest dedykowany badaniom kompleksów metali przejściowych czwartego okresu posiadających grupę NO<sub>2</sub> przyłączoną do centrum metalicznego. Na potrzeby projektu wybraliśmy metale takie, jak Ni, Co lub Cu, jako że są one stosunkowo tanie i dostępne. Grupa NO<sub>2</sub> może być przyłączona do metalu na różne sposoby: jedynie poprzez atom azotu (M–N(O)<sub>2</sub>), wykorzystując tylko atom tlenu (M–O–NO), itd. Kompleksy, które różnią się sposobem przyłączeniem ligandu nazywamy izomerami połączeniowymi. W celu przełączenia układu pomiędzy takimi izomerami, jeżeli to jest możliwe, można użyć światła lub energii cieplnej. W pierwszym przypadku światło może przeprowadzić układ do stanów, które są stosunkowo krótko żyjące, a przez to trudne do obserwacji. Z tego powodu zamierzamy zastosować fotokrystalograficzne metody *in situ*, które to pozwolą na śledzenie zmian strukturalnych zachodzących podczas transformacji grupy NO<sub>2</sub> z jednego izomeru (np. *nitro*) w drugi (np. *nitrito*) i *vice versa*, wyznaczenie stopnia konwersji i analizę stopnia zależności procesu przełączenia od długości fali światła i temperatury.

Ogólny schemat działania w ramach projektu obejmuje następujące etapy: synteza i krystalizacja układów → modelowanie za pomocą narzędzi krystalograficznych i chemii kwantowej → pomiary fizykochemiczne (w tym pomiary fotokrystalograficzne) → zrozumienie zjawisk. Poznanie natury procesów przełączania grupy NO<sub>2</sub>, a także wpływu centrum metalicznego i ligandów, może przyczynić się w przyszłości do świadomego i racjonalnego projektowania materiałów o konkretnych właściwościach, pożądanych w kontekście zastosowań w optoelektronice, w wydajnych nośnikach danych czy jako materiały zmieniających kolor, itp. Co więcej, realizacja projektu może pomóc w lepszym zrozumieniu procesów biologicznych, w których kluczowym jest oddziaływanie materii ze światłem.